Acta Cryst. (1980). A**36**, 785–792

Le Groupe $P1$ et ses Sous-Groupes. III. Conservation Réticulaire*

PAR MONIQUE ROLLEY-LE COZ

Laboratoire MR3 (Algèbre de Von Neumann et Algèbres Commutatives), Université de Bretagne Occidentale, 6, avenue Le Gorgeu, 29283 *Brest, France*

ET YVES BILLIET†

Chimie et Symétrie, Laboratoire CR5 (Chimie Inorganique Moléculaire), Université de Bretagne Occidentale, 6, avenue Le Gorgeu, 29283 *Brest, France*

(*Reçu le* 3 *décembre* 1979, *accepté le* 1 *avril* 1980)

Abstract

This paper is the continuation of two previous ones devoted to the properties and the derivation of the isomorphic subgroups of $p1 \approx \mathbb{Z}^2$, $P1 \approx \mathbb{Z}^3$, ..., $\mathbb{Z}^n$ [Billiet (1979). *Acta Cryst.* A**35**, 485–496; Billiet & Rolley-Le Coz (1980). *Acta Cryst.* A**36**, 242–248]. The preservation of the lattice points, of the lattice directions and of the lattice planes of the group $\Gamma(P1)$ by an isomorphic subgroup γ of index i are studied here. The typical feature is as follows: every lattice direction (respectively plane) is either unpreserved or preserved by γ with the same preservation rate as the origin lattice direction (respectively plane). One plane out of p'_3 lattice planes is partially preserved; in each preserved lattice plane, one direction out of p'_2 lattice directions is partially preserved; along a preserved lattice direction, one point out of p'_1 lattice points is preserved; $p'_1 p'_2 p'_3 = i$. Algorithms for the identification of preserved lattice points, directions and planes are shown with several practical examples.

Dans deux précédents mémoires, nous avons mis au point les méthodes nécessaires à l'étude des sous-groupes spatiaux isomorphes des groupes spatiaux $p1 \approx \mathbb{Z}^2$, $P1 \approx \mathbb{Z}^3$, ..., $\mathbb{Z}^n$ (Billiet, 1979), au dénombrement, à l'énumération et au classement de ces sous-groupes isomorphes (Billiet & Rolley-Le Coz, 1980).

Le présent mémoire est consacré à une question abordée précédemment (Billiet, 1979): 'Dans quelle mesure les plans réticulaires de $P1$ sont-ils conservés dans tel sous-groupe isomorphe?'. Notre intérêt pour cette question se justifie par ses applications immédiates au niveau des méthodes de diffraction.

Pour l'essentiel des références bibliographiques et pour la majeure partie des concepts mathématiques et des notations utilisés, nous renvoyons le lecteur à nos précédents mémoires.

I. Conservation des rangées réticulaires dans les sous-groupes du groupe d'espace bidimensionnel $p1$

Nous commençons cette étude en dimension 2 car les résultats sont faciles à visualiser et permettent de mieux comprendre la démarche suivie en dimension 3.

Dans toute cette partie, nous désignons par Γ le groupe de symbole $p1$ de maille conventionnelle $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$ et par γ le sous-groupe *propre* isomorphe (donc de symbole $p1$ également) dont une maille conventionnelle $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ est donnée par la relation matricielle

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{A}, \mathbf{B})\mathrm{S}; \quad \mathrm{S} = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{vmatrix};$$

les coefficients de S sont entiers et l'indice i est égal à la valeur absolue de DétS (*supérieure* à 1).

Considérons maintenant la famille ρ des rangées réticulaires $[U, V]$ de Γ (U et V sont des entiers *premiers entre eux* égaux aux coordonnées du premier noeud de la rangée passant par l'origine; le vecteur $\mathbf{A}' = U\mathbf{A} + V\mathbf{B}$ donne la direction des rangées). De l'ensemble des noeuds du réseau de Γ, le sous-groupe γ ne garde évidemment qu'une fraction égale à $1/i$ et la famille ρ n'est pas entièrement conservée par γ. Une question se pose: 'Existe-t-il des rangées ρ entièrement conservées par γ, d'autres partiellement conservées et d'autres enfin dont aucun noeud n'appartient à γ?'. La réponse à cette question fait intervenir deux étapes préliminaires.

* English translations, not 'refereed', may be obtained from the authors upon request.

† A qui doit être adressée toute correspondance.

0567-7394/80/050785-08$01.00

1 ère étape

On construit une nouvelle maille conventionnelle de Γ dont le premier vecteur est le vecteur $\mathbf{A}'$ donnant la direction des rangées de ρ:

$$(\mathbf{A}',\mathbf{B}') = (\mathbf{A},\mathbf{B})\mathsf{M}'; \quad \mathsf{M}' = \begin{vmatrix} U & \alpha \\ V & \beta \end{vmatrix}.$$

En effet, U et V étant premiers entre eux, le théorème de Bezout affirme l'existence d'au moins deux entiers α et β tels que $U\beta - V\alpha = 1$; ces deux entiers peuvent d'ailleurs être trouvés par l'algorithme d'Euclide (*cf.* Billiet, 1979). Dans ces conditions, $(\mathbf{A}',\mathbf{B}')$ est bien une maille conventionnelle de Γ car la matrice M' est unimodulaire à coefficients entiers. Les rangées de Γ sont parallèles au vecteur $\mathbf{A}'$ et leurs ordonnées (relatives à $\mathbf{B}'$) sont les nombres entiers (Fig. 1*a*,*b*,*c*,*d*). Par ailleurs:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A},\mathbf{B}) &= (\mathbf{A}',\mathbf{B}')\mathsf{M}'^{-1}; \\ (\mathbf{a},\mathbf{b}) &= (\mathbf{A}',\mathbf{B}')\mathsf{S}'; \\ \mathsf{S}' &= \mathsf{M}'^{-1}\mathsf{S}; \\ \text{Dét}\mathsf{S}' &= \text{Dét}\mathsf{S} = \pm i. \end{aligned}$$

2 ème étape

On construit une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{a}',\mathbf{b}')$ de γ dont le premier vecteur est un multiple de $\mathbf{A}'$ en triangulant la matrice S' par la 'méthode des pivots' exposée antérieurement (Billiet & Rolley-Le Coz, 1980):

$$(\mathbf{a}',\mathbf{b}') = (\mathbf{A}',\mathbf{B}')\mathsf{T}';$$

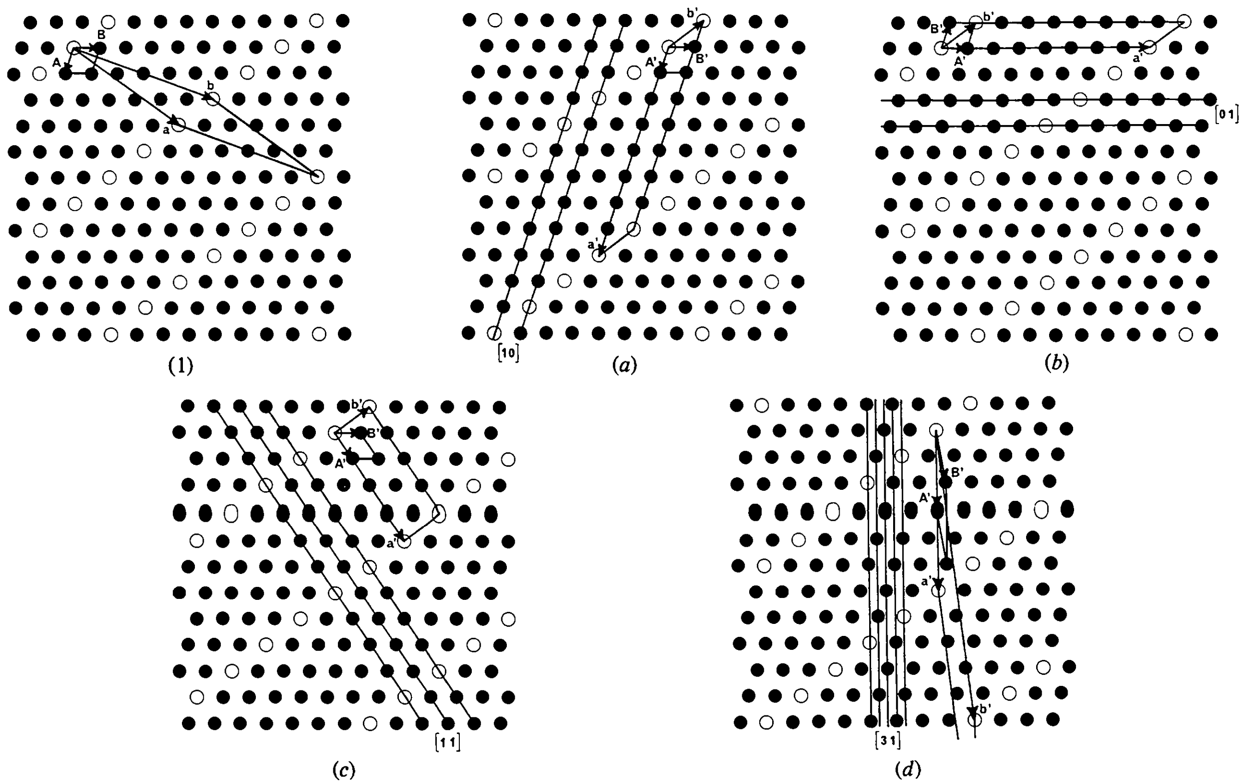
$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\mathsf{N}' = \begin{vmatrix} p'_1 & q'_1 \\ 0 & p'_2 \end{vmatrix}.$$

La matrice de triangulation N' est unimodulaire à coefficients entiers; il n'existe qu'une seule matrice T' telle que: p'_1, p'_2 entiers positifs, $\text{Dét}\mathsf{T}' = p'_1 p'_2 = i$; q'_1 entier, $-p'_1/2 < q'_1 \leq p'_1/2$.

En conséquence, le sous-groupe Γ conserve le p'_1ème noeud de la rangée passant par l'origine et, d'une façon plus générale, seuls sont conservés les $\lambda p'_1$èmes noeuds de cette rangée ($\lambda \in \mathbb{Z}$): elle est donc conservée par γ avec le coefficient de conservation $1/p'_1$. Quant aux autres rangées de ρ, ou bien elles sont conservées avec ce même coefficient ou bien elles ne sont pas du tout conservées. En effet, γ conserve les noeuds donnés par les vecteurs:

$$\begin{aligned} \lambda\mathbf{a}' + \mu\mathbf{b}' &= \lambda p'_1\mathbf{A}' + \mu(q'_1\mathbf{A}' + p'_1\mathbf{B}') \\ &= (\lambda p'_1 + \mu q'_1)\mathbf{A}' + \mu p'_2\mathbf{B}'. \end{aligned}$$

En d'autres termes, seuls les $(\lambda p'_1 + \mu q'_1)$èmes noeuds des $\mu p'_2$èmes rangées sont conservés ($\lambda, \mu \in \mathbb{Z}$); seules donc sont conservées, avec coefficient $1/p'_1$, les rangées



(1) (*a*) (*b*) (*c*) (*d*)

Fig. 1. Conservation des rangées réticulaires dans un sous-groupe isomorphe du groupe $p1$: le type de conservation dépend de la direction de la famille de rangées.

dont les ordonnées (relatives à **B**′) sont les multiples de $p'_2 = i/p'_1$ (c'est-à-dire, une rangée toutes les p'_2 rangées); dans les autres rangées, aucun noeud n'est conservé par γ.

Exemple 1. On considère le sous-groupe $p1$ donné par la matrice S:

$$\mathsf{S} = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 5 & 6 \end{vmatrix}.$$

Comment sont conservées les familles de rangées suivantes [1,0], [0,1], [1,1], [3,1]?

(*a*) [1,0]: $\alpha = 0, \beta = 1$, S′ = S,

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 6 & -1 \\ -5 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 8 & -1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

(*cf.* Billiet & Rolley-Le Coz, 1980). Toutes les rangées [1,0] sont conservées au 1/8 ème; seuls sont conservés les $(8\lambda - \mu)$èmes noeuds des μ èmes rangées (Fig. 1*a*).

(*b*) [0,1]: $\alpha = -1, \beta = 0$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 5 & 6 \\ -3 & -2 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} -2 & -1 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 8 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Toutes les rangées [0,1] sont conservées au 1/8 ème; seuls sont conservés les $(8\lambda + \mu)$èmes noeuds des μèmes rangées (Fig. 1*b*).

(*c*) [1,1]: $\alpha = 0, \beta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 4 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 4 & -1 \\ 0 & 2 \end{vmatrix}.$$

Une rangée [1,1] sur deux est conservée au quart; seuls sont conservés les $(4\lambda - \mu)$èmes noeuds des 2μèmes rangées (Fig. 1*c*).

(*d*) [3,1]: $\alpha = 2, \beta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & -2 \\ -1 & 3 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} -7 & -10 \\ 12 & 16 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 4 & 7 \\ -3 & -5 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 4 \end{vmatrix}.$$

Une rangée [3,1] sur quatre est à moitié conservée; seuls sont conservés les $(2\lambda + \mu)$èmes noeuds des 4μèmes rangées (Fig. 1*d*).

Remarques

Au lieu de désigner la famille de rangées ρ par les coordonnées U, V du premier noeud de la rangée passant par l'origine, on peut utiliser les indices de Miller (H,K); la transcription de la méthode n'offre aucune difficulté car $U = K$ et $V = -H$.

Si on s'intéresse au seul coefficient de conservation des rangées ρ sans chercher à connaître les noeuds effectivement conservés, il n'est pas nécessaire de trianguler S′ car p'_2 est égal au plus grand commun diviseur (p.g.c.d.) des termes de la seconde ligne de S′ (Billiet & Rolley-Le Coz, 1980); le coefficient de conservation est p'_2/i.

Exemple 1 (*suite*). Quel est le coefficient de conservation des rangées [7, 1]?
$\alpha = 6, \beta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & -6 \\ -1 & 7 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} -27 & -34 \\ 32 & 40 \end{vmatrix}.$$

Le p.g.c.d. de 32 et 40 étant 8, une rangée [7, 1] toutes les 8 rangées est entièrement conservée.

II. Conservation des rangées réticulaires dans les sous-groupes du groupe d'espace tridimensionnel *P*1

La méthode exposée précédemment s'étend en dimension 3. Par Γ, (**A**, **B**, **C**), γ, (**a**, **b**, **c**) et S, nous entendons désormais un groupe d'espace $P1$, une maille conventionnelle de celui-ci, un sous-groupe propre isomorphe $(P1)$, une maille conventionnelle de ce dernier et la matrice de passage;

$$(\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}) = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\mathsf{S};$$
$$\mathsf{S}(3 \times 3)\colon s_{ij} \in \mathbb{Z};$$

indice de γ dans Γ: $i = |\mathrm{Dét}\,\mathsf{S}| > 1$.

La famille ρ des rangées réticulaires $[U, V, W]$ de Γ a la direction du vecteur $\mathbf{A}' = U\mathbf{A} + V\mathbf{B} + W\mathbf{C}$ [le p.g.c.d. de U, V et W étant égal à 1; $D(U, V, W) = 1$].

On construit d'abord une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{A}', \mathbf{B}', \mathbf{C}')$ de Γ telle que:*

$$(\mathbf{A}', \mathbf{B}', \mathbf{C}') = (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})\mathsf{M}';$$

$$\mathsf{M}' = \begin{vmatrix} U & \alpha & \gamma U_1 \\ V & \beta & \gamma V_1 \\ W & 0 & \delta \end{vmatrix}.$$

En effet, $D(U,V)$ étant le p.g.c.d. de U et V, $U_1 = U/D(U,V)$ et $V_1 = V/D(U,V)$ sont premiers entre eux et on peut trouver deux entiers α et β tels que $U_1\beta - V_1\alpha = 1$,† c'est-à-dire, tels que $U\beta - V\alpha = D(U, V)$. $D(U, V)$ et W sont nécessairement premiers

* La méthode s'étend à $\mathbb{Z}^n$ muni de la base $(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \ldots, \mathbf{A}_n)$. Quelle que soit la famille de rangées $[U_1, U_2, \ldots, U_n]$, il est possible de trouver une nouvelle base $(\mathbf{A}'_1, \mathbf{A}'_2, \ldots, \mathbf{A}'_n)$ admettant comme premier vecteur le vecteur $\mathbf{A}'_1 = U_1\mathbf{A}_1 + U_2\mathbf{A}_2 + \cdots + U_n\mathbf{A}_n$:

$$(\mathbf{A}'_1, \mathbf{A}'_2, \ldots, \mathbf{A}'_n) = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \ldots, \mathbf{A}_n)\mathsf{M}'.$$

La matrice de passage est unimodulaire à coefficients entiers.

† Remarquons que α et β sont nécessairement premiers entre eux.

entre eux et on peut trouver deux entiers γ et δ tels que $D(U,V)\delta - W\gamma = 1$. Dans ces conditions:

$$\begin{aligned}\text{Dét}\mathsf{M}' &= W\gamma(\alpha V_1 - \beta U_1) + \delta(U\beta - V\alpha)\\ &= -W\gamma + \delta D(U,V) = 1;\end{aligned}$$

M' est une matrice unimodulaire à coefficients entiers et $(\mathbf{A}',\mathbf{B}',\mathbf{C}')$ est une maille conventionnelle de Γ.

$$\begin{gathered}(\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C}) = (\mathbf{A}',\mathbf{B}',\mathbf{C}')\mathsf{M}'^{-1};\\ (\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}) = (\mathbf{A}',\mathbf{B}',\mathbf{C}')\mathsf{S}';\\ \mathsf{S}' = \mathsf{M}'^{-1}\mathsf{S};\\ \text{Dét}\mathsf{S}' = \text{Det}\mathsf{S} = \pm i.\end{gathered}$$

On construit ensuite une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{a}',\mathbf{b}',\mathbf{c}')$ de γ en triangulant S':

$$(\mathbf{a}',\mathbf{b}',\mathbf{c}') = (\mathbf{A}',\mathbf{B}',\mathbf{C}')\mathsf{T}';$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\mathsf{N}' = \begin{vmatrix} p_1' & q_1' & r_1' \\ 0 & p_2' & q_2' \\ 0 & 0 & p_3' \end{vmatrix};$$

N' matrice de triangulation unimodulaire à coefficients entiers; T' est unique; p_1', p_2', p_3' sont des entiers positifs; $\text{Dét}\mathsf{T}' = p_1'p_2'p_3' = i$; q_1', q_2', r_1' sont des entiers; $-p_1'/2 < q_1' \le p_1'/2$; $-p_2'/2 < q_2' \le p_2'/2$; $-p_1'/2 < r_1' \le p_1'/2$.

Il en résulte que la rangée passant par l'origine est conservée par γ avec le coefficient $1/p_1'$. Les autres rangées sont, soit conservées avec ce même coefficient, soit non conservées, une rangée toutes les i/p_1' rangées étant conservée. Il est intéressant de noter la façon dont les rangées conservées se distribuent dans l'espace. Pour cela remarquons que les vecteurs $\mathbf{A}' = U\mathbf{A} + V\mathbf{B} + W\mathbf{C}$ et $\mathbf{B}' = \alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{B}$ définissent un plan réticulaire, passant par l'origine, de la famille d'indices de Miller (H^0, K^0, L^0) relatifs à $(\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$:

$$H^0 = -W\beta, \quad K^0 = W\alpha, \quad L^0 = D(U,V).*$$

Le sous-groupe γ conserve les noeuds définis par (λ, μ, $\nu \in \mathbb{Z}$):

$$\begin{aligned}&\lambda\mathbf{a}' + \mu\mathbf{b}' + \nu\mathbf{c}'\\ &= \lambda p_1'\mathbf{A}' + \mu(q_1'\mathbf{A}' + p_2'\mathbf{B}') + \nu(r_1'\mathbf{A}' + q_2'\mathbf{B}' + p_3'\mathbf{C}')\\ &= (\lambda p_1' + \mu q_1' + \nu r_1')\mathbf{A}' + (\mu p_2' + \nu q_2')\mathbf{B}' + \nu p_3'\mathbf{C}';\end{aligned}$$

seuls sont conservés les $(\lambda p_1' + \mu q_1' + \nu r_1')$èmes noeuds des $(\mu p_2' + \nu q_2')$èmes rangées des $\nu p_3'$èmes plans réticulaires (H^0, K^0, L^0). Autrement dit, seuls sont conservés, avec le coefficient de conservation p_3'/i, les plans dont les cotes (relatives à $\mathbf{C}'$) sont les multiples de p_3', c'est-à-dire, un plan tous les p_3' plans; dans chacun des plans partiellement conservés, seule une rangée toutes les p_2' rangées est en partie conservée; le long des rangées partiellement conservées, seul un noeud tous les p_1' noeuds est conservé.

* Les points (X^0, Y^0, Z^0) du plan (H^0, K^0, L^0) passant par l'origine vérifient la relation $H^0X^0 + K^0Y^0 + L^0Z^0 = 0$. Par ailleurs $D(H^0, K^0, L^0) = 1$ car α et β sont premiers entre eux, de même que W et $D(U,V)$.

Exemple 2. Soit le sous-groupe $P1$ donné par la matrice S:

$$\mathsf{S} = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 3 \end{vmatrix}.$$

Comment se conservent les familles de rangées [1,0,0], [0,1,0], [0,0,1], [0,2,1], [1,1,1]?

(*a*) [1,0,0]: $D(U,V) = 1$, $\alpha = 0$, $\beta = 1$, $\gamma = 0$, $\delta = 1$, $\mathsf{S}' = \mathsf{S}$.

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Une rangée sur 4 est conservée au 1/2. Tous les plans ($H^0 = 0$, $K^0 = 0$, $L^0 = 1$) sont conservés au 1/8 ème. Seuls sont conservés les $(2\lambda + 2\nu)$èmes noeuds des $(4\mu + 2\nu)$ rangées des ν èmes plans.

(*b*) [0, 1, 0]: $D(U, V) = 1$, $\alpha = -1$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$, $\delta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 2 & 2 & 2 \\ -2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 3 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 4 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Une rangée sur deux est conservée au quart. Tous les plans (0, 0, 1) sont conservés au 1/8 ème. Seuls sont conservés les $(4\lambda + 2\nu)$ èmes noeuds des 2μèmes rangées des νèmes plans.

(*c*) [0, 0, 1]: $D(U, V) = 0$, $U_1 = 0$, $V_1 = -1$,* $\alpha = 1$, $\beta = 0$, $\gamma = -1$, $\delta = 0$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}'\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}.$$

Une rangée sur quatre est conservée au demi. Un plan (0,1,0) sur deux est conservé au quart: une rangée toutes les deux rangées y est conservée au demi. Seuls

* U et V étant tous les deux nuls, les valeurs de U_1 et V_1 sont arbitraires; elles ont été choisies de manière à ce que la matrice M' soit unimodulaire à coefficients entiers et que l'expression de M'^{-1} soit la plus simple possible.

sont conservés les $(2\lambda + \nu)$èmes noeuds des 2μèmes rangées des 2νèmes plans.

(*d*) [0, 2, 1]: $D(U, V) = 2$, $\alpha = -1$, $\beta = 0$, $\gamma = 1$, $\delta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}' \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}.$$

Une rangée sur huit est entièrement conservée. Un plan (0,−1,2) sur quatre conserve une rangée entière toutes les deux rangées. Sont conservés exclusivement tous les noeuds des 2μèmes rangées des 4νèmes plans.

(*e*) [1, 1, 1]: $D(U, V) = 1$, $\alpha = 0$, $\beta = 1$, $\gamma = 0$, $\delta = 1$.

$$\mathsf{M}'^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}' = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & 3 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}' = \mathsf{S}' \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Une rangée sur deux est au quart conservée. Tous les plans $(-1, 0, 1)$ sont conservés au 1/8 ème: une rangée sur deux y est conservée au quart. Seuls sont conservés les $(4\lambda + 2\mu + 2\nu)$èmes noeuds des 2μèmes rangées des νèmes plans.

III. Conservation des plans réticulaires dans les sous-groupes de $P1$

La méthode précédente a permis, au passage, d'étudier la conservation des familles de plans réticulaires (H^0, K^0, L^0) mais elle ne s'applique pas à toutes les familles de plans réticulaires de la zone d'axe $[U, V, W]$. Elle ne s'applique pas non plus aux familles de plans n'appartenant pas à cette zone. Nous développons maintenant une méthode un peu différente applicable à l'étude de la conservation de n'importe quelle famille de plans réticulaires.

Soit P le plan passant par l'origine de la famille ϖ des plans réticulaires d'indices de Miller (H, K, L) relatifs à la maille conventionnelle $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ [avec $D(H, K, L) = 1$].

1. *Construction d'une nouvelle maille conventionnelle de Γ*

Nous allons construire une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')$ telle que $\mathbf{A}''$ et $\mathbf{B}''$ soient dans P.

$$(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'') = (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})\mathsf{M}'';$$

$$\mathsf{M}'' = \begin{vmatrix} K_1 & \alpha L & \gamma \\ -H_1 & \beta L_1 & \delta \\ 0 & -D(H, K) & \varepsilon \end{vmatrix}$$

avec $H_1 = H/D(H, K)$, $K_1 = K/D(H, K)$, et $L = L/D(K, L)$.

Puisque $D(H, K, L) = 1$, $D(H, K)$ est premier avec $D(K, L)$, K est divisible par $D(H, K).D(K, L)$ et K_1 est divisible par $D(K, L)$; comme H_1 est premier avec K_1, H_1 est premier avec $K_1/D(K, L)$ et il existe au moins deux entiers α et β tels que:

$$\alpha H_1 + \beta K_1/D(K, L) = 1.$$

Puisque $D(H, K, L) = 1$, le théorème de Bezout (*cf.* Billiet, 1979) stipule l'existence de trois entiers γ, δ, ε tels que:

$$\gamma H + \delta K + \varepsilon L = 1.$$

Calculons le déterminant de M'':

$$\begin{aligned} \text{Dét}\mathsf{M}'' &= \gamma H_1 D(H, K) + \delta K_1 D(H, K) \\ &\quad + \varepsilon L_1 D(K, L)[\alpha H_1 + \beta K_1/D(K, L)] \\ &= \gamma H + \delta K + \varepsilon L = 1. \end{aligned}$$

La matrice M'' étant unimodulaire à coefficients entiers, la maille $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')$ est une maille conventionnelle de Γ. *Les vecteurs* $\mathbf{A}''$ *et* $\mathbf{B}''$ *appartiennent au plan réticulaire* P* *et forment* en conséquence *une base*† de celui-ci car on a:

$$\begin{aligned} &H.K_1 + K.(-H_1) + L.0 = HK/D(H, K) \\ &\qquad - KH/D(H, K) = 0; \\ &H.\alpha L + K.\beta L_1 - L.D(H, K) \\ &\qquad = L.D(H, K)[\alpha H_1 + \beta K_1/D(K, L)] \\ &\qquad -L.D(H, K) = 0. \end{aligned}$$

Il en résulte ce qui suit:

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')\mathsf{M}''^{-1};$$

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')\mathsf{S}'';$$

$$\mathsf{S}'' = \mathsf{M}''^{-1}\mathsf{S}; \quad \text{Dét}\mathsf{S}'' = \text{Dét}\mathsf{S} = \pm i.$$

2. *Construction d'une nouvelle maille conventionnelle de γ. Conservation des plans réticulaires*

Par triangulation de S'', on obtient comme précédemment (*cf.* II) une nouvelle maille conven-

* Le plan réticulaire $P(H, K, L)$ est un sous-groupe bidimensionnel pl de $\Gamma(p1)$ de maille conventionnelle $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'')$; la rangée $[\gamma, \delta, \varepsilon]$ passant par l'origine est un sous-groupe unidimensionnel p1 de 'maille conventionnelle' $(\mathbf{C}'')$. $P1$ est le produit direct $pl \otimes \text{p}1$.

† Le vecteur $\mathbf{A}''$ est situé dans le plan $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$. Dans la plupart des cas, le vecteur $\mathbf{B}''$ n'appartient ni au plan $(\mathbf{A}, \mathbf{C})$, ni au plan $(\mathbf{B}, \mathbf{C})$. Il n'est pas toujours possible de trouver un vecteur $\mathbf{B}_0''$ du plan $(\mathbf{A}, \mathbf{C})$ ou du plan $(\mathbf{B}, \mathbf{C})$ tel que $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}_0'')$ soit une base du plan réticulaire P.

tionnelle $(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'', \mathbf{c}'')$ de γ; les vecteurs $\mathbf{a}''$ et $\mathbf{b}''$ sont situés dans le plan réticulaire P, le vecteur $\mathbf{a}''$ étant un multiple du vecteur $\mathbf{A}''$:

$$(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'', \mathbf{c}'') = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')\mathrm{T}'';$$

$$\mathrm{T}'' = \mathrm{S}''\mathrm{N}'' = \begin{vmatrix} p_1'' & q_1'' & r_1'' \\ 0 & p_2'' & q_2'' \\ 0 & 0 & p_3'' \end{vmatrix};$$

N'' est unimodulaire à coefficients entiers, T'' est unique; p_1'', p_2'', p_3'' entiers positifs; $\mathrm{DétT}'' = p_1''p_2''p_3'' = i$; q_1'', q_2'', r_1'' entiers; $-p_1''/2 < q_1'' \le p_1''/2$; $-p_2''/2 < q_2'' \le p_2''/2$; $-p_1''/2 < r_1'' \le p_1''/2$.

Un plan réticulaire tous les p_3'' plans (H, K, L) est donc conservé avec le coefficient p_3''/i. Dans chaque plan conservé, seule une rangée sur p_2'' rangées $[U^0 = K_1, V^0 = -H_1, W^0 = 0]$ est partiellement conservée. Le long d'une rangée conservée, seul un noeud tous les p_1'' noeuds est conservé par le sous-groupe γ.

Exemple 3. Comment se conservent les familles de plans réticulaires (1,0,0), (0,0,1) et (2,3,6) dans le sous-groupe $P1$ donné par la matrice S?

$$\mathrm{S} = \begin{vmatrix} 1 & 8 & 4 \\ -3 & 7 & 3 \\ -4 & 4 & 4 \end{vmatrix}.$$

(*a*) (1,0,0): $D(H,K) = 1$, $H_1 = 1$, $K_1 = 0$, $D(K,L) = 0$, $L_1 = 0$, $\alpha = 1, \beta = 0, \gamma = 1, \delta = 0, \varepsilon = 0$.

$$\mathrm{M}'' = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathrm{M}''^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix};$$

$$\mathrm{S}'' = \begin{vmatrix} 3 & -7 & -3 \\ 4 & -4 & -4 \\ 1 & 8 & 4 \end{vmatrix};$$

$$\mathrm{T}'' = \mathrm{S}'' \begin{vmatrix} 4 & 0 & 1 \\ -5 & 1 & -1 \\ 9 & -2 & 2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 20 & -1 & 4 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Tous les plans (1,0,0) sont conservés au 1/80 ème; dans chaque plan une rangée $[0,-1,0]$ toutes les quatre rangées est partiellement conservée car un noeud tous les 20 noeuds y est conservé. En résumé seuls sont conservés les $(20\lambda - \mu + 4\nu)$èmes noeuds des 4μèmes rangées des νèmes plans réticulaires.

(*b*) (0,0,1): $D(H,K) = 0$, $H_1 = 0$, $K_1 = 1$,* $D(K,L) = 1$, $L_1 = 1$, $\alpha = 0, \beta = 1, \gamma = 0, \delta = 1, \varepsilon = 1$.

* H et K étant nuls, H_1 et K_1 sont arbitraires. Leurs valeurs ont été choisies de manière à ce que l'expression de M''^{-1} soit la plus simple possible.

$$\mathrm{M}'' = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \mathrm{M}''^{-1}; \quad \mathrm{S}'' = \mathrm{S};$$

$$\mathrm{T}'' = \mathrm{S}'' \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 5 & -1 & 0 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}.$$

Un plan (0,0,1) sur 4 est conservé au 1/20 ème; dans chaque plan conservé, une rangée [1,0,0] sur quatre est partiellement conservée, un noeud sur cinq y étant conservé. Sont conservés les $(5\lambda - \mu)$èmes noeuds des $(4\mu - \nu)$èmes rangées des 4νèmes plans.

(*c*) (2,3,6): $D(H,K) = 1$, $H_1 = 2$, $K_1 = 3$, $D(K,L) = 3$, $L_1 = 2$, $\alpha = 1, \beta = -1, \gamma = -1, \delta = -1, \varepsilon = 1$.

$$\mathrm{M}'' = \begin{vmatrix} 3 & 6 & -1 \\ -2 & -2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{vmatrix}; \quad \mathrm{M}''^{-1} = \begin{vmatrix} -3 & -5 & -8 \\ 2 & 3 & 5 \\ 2 & 3 & 6 \end{vmatrix};$$

$$\mathrm{S}'' = \begin{vmatrix} 44 & -91 & -59 \\ -27 & 57 & 37 \\ -31 & 61 & 41 \end{vmatrix};$$

$$\mathrm{T}'' = \mathrm{S}'' \begin{vmatrix} 2 & 67 & -4 \\ -1 & -13 & 0 \\ 3 & 70 & -3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 40 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Tous les plans (2,3,6) sont conservés au 1/80 ème; dans chaque plan, une rangée $[3,-2,0]$ est conservée toutes les 40 rangées; dans chaque rangée conservée, un noeud sur deux est conservé. Sont conservés les $(2\lambda + \mu + \nu)$èmes noeuds des $(40\mu - 3\nu)$èmes rangées des νèmes plans.

Remarque

Si on s'intéresse uniquement aux plans conservés et à leur coefficient de conservation, il n'est pas nécessaire de trianguler S'' car p_3'' est égal au p.g.c.d. des termes de la troisième ligne de S'': un plan sur p_3'' plans est conservé avec le coefficient p_3''/i.

Exemple 3 (*suite*). Comment sont conservés les plans (1, 0, 0)?

$D(H,K) = 1$, $H_1 = 0$, $K_1 = 0$, $D(K,L) = 1$, $L_1 = 0$, $\alpha = 0, \beta = 1, \gamma = 0, \delta = 1, \varepsilon = 0$.

$$\mathrm{M}'' = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathrm{M}''^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix};$$

$$\mathrm{S}'' = \begin{vmatrix} 1 & 8 & 4 \\ 4 & -4 & -4 \\ -3 & 7 & 3 \end{vmatrix}.$$

Puisque $D(-3,7,3) = 1$, les plans $(1,0,0)$ sont tous conservés au 1/80 ème.

3. *Conservation des familles de rangées d'une famille de plans réticulaires donnée*

La méthode que nous venons d'exposer a permis d'étudier la conservation des rangées $[U^0, V^0, 0]$ de la famille $\bar{\omega}$ des plans réticulaires (H, K, L). Nous désirons maintenant connaître la conservation de n'importe quelle autre famille $\rho[U, V, W]$ de rangées appartenant aux plans (H,K,L).

Par rapport à la base $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')$ la famille ρ est donnée par les indices $U'', V'', 0$ et l'on a la relation:

$$\begin{vmatrix} U \\ V \\ W \end{vmatrix} = \mathsf{M}'' \begin{vmatrix} U'' \\ V'' \\ 0 \end{vmatrix}.$$

D'où l'on tire sans difficulté les formules de transformation:

$$U = U'' K_1 + V'' \alpha L,$$
$$V = -U'' H_1 + V'' \beta L_1,$$
$$W = -V'' D(H, K),$$

avec $D(U'', V'') = 1$ et les formules réciproques

$$U'' = U/K_1 + W\alpha\, L/K = -V/H_1 - W\beta\, L_1/H,$$
$$V'' = -W/D(H, K),$$

avec $D(U, V, W) = 1$ et $HU + KV + LW = 0$.

Pour étudier la conservation des rangées ρ de la famille (H,K,L), il suffit d'en étudier la conservation dans le seul plan P passant par l'origine, les autres plans étant soit non conservés, soit conservés d'une manière analogue à celle de P.

Considérons l'intersection du sous-groupe ν avec le plan réticulaire P. Cette intersection est un sous-groupe γ_P $(p1)$ de maille conventionnelle $(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'')$ isomorphe du plan réticulaire P considéré en tant que groupe Γ_P $(p1)$ de maille conventionnelle $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'')$; $(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'')$ est donné par la restriction à P de la matrice T'':

$$(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'') = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'')\mathsf{T}''_P;$$

$$\mathsf{T}''_P = \begin{vmatrix} p''_1 & q''_1 \\ 0 & p''_2 \end{vmatrix}.$$

Le problème se ramène donc à la conservation des rangées en dimension 2.

On définit une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{A}''', \mathbf{B}''')$ de Γ_P admettant comme premier vecteur le vecteur $U''\mathbf{A}'' + V''\mathbf{B}''$:

$$(\mathbf{A}''', \mathbf{B}''') = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'')\mathsf{M}''_P;$$

$$\mathsf{M}''_P = \begin{vmatrix} U'' & \alpha'' \\ V'' & \beta'' \end{vmatrix};\quad U''\beta'' - V''\alpha'' = 1;$$

$$(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'') = (\mathbf{A}''', \mathbf{B}''')\mathsf{M}''^{\,-1}_P\mathsf{T}''_P.$$

Puis on construit une nouvelle maille conventionnelle $(\mathbf{a}''', \mathbf{b}''')$ de γ_P, admettant comme premier vecteur un multiple du vecteur $\mathbf{A}''' = U''\mathbf{A}'' + V''\mathbf{B}''$, par triangulation de la matrice $\mathsf{M}''^{\,-1}_P\mathsf{T}''_P$:

$$(\mathbf{a}''', \mathbf{b}''') = (\mathbf{A}''', \mathbf{B}''')\mathsf{T}'''_P;$$

$$\mathsf{T}'''_P = \mathsf{M}''^{\,-1}_P\mathsf{T}''_P\mathsf{N}'''_P = \begin{vmatrix} p'''_1 & q'''_1 \\ 0 & p'''_2 \end{vmatrix}.$$

N'''_P est unimodulaire à coefficients entiers, T'''_P est unique; p'''_1, p'''_2 entiers positifs; $p'''_1\, p'''_2 = i/p''_3$; q'''_1 entier; $-p'''_1/2 < q'''_1 \le p'''_1/2$.

Dans le plan P, une rangée $[U, V, W]$ est conservée toutes les p'''_2 rangées; sur chaque rangée conservée, un noeud est conservé tous les p'''_1 noeuds. La situation est la même pour tous les plans conservés de la famille (H, K, L).

Exemple 3 (*suite de* 3*c*). Dans les plans $(2,3,6)$, comment sont conservées les rangées $[6,2,-3]$? On calcule sans difficulté:

$$U'' = -4;\quad V'' = 3;\quad \mathsf{M}'''_P = \begin{vmatrix} -4 & 1 \\ 3 & -1 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{M}'''^{\,-1}_P = \begin{vmatrix} -1 & -1 \\ -3 & -4 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}''_P = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 40 \end{vmatrix};\quad \mathsf{M}'''^{\,-1}_P\mathsf{T}''_P = \begin{vmatrix} -2 & -41 \\ -6 & -163 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{T}'''_P = \mathsf{M}'''^{\,-1}_P\mathsf{T}''_P \begin{vmatrix} -163 & 27 \\ 6 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 80 & -13 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Les rangées $[6,2,-3]$ du plan P sont toutes conservées au 1/80 ème. Il en est de même pour les autres plans $(2,3,6)$ car tous sont conservés.

Conclusion

Une utilité immédiate de la conservation réticulaire s'offre au niveau des méthodes de diffraction. Lorsque les plans de la famille (H,K,L) sont tous conservés (nécessairement avec le même coefficient) le passage de Γ à γ ne donne pas lieu à l'apparition de taches de surstructure pour cette famille de plans réticulaires. Au contraire, si seulement un plan (H,K,L) tous les p_3'' plans est conservé (partiellement ou totalement), il apparaîtra des taches de surstructure correspondant aux indices H/p_3'', K/p_3'', L/p_3''. Cette question sera reprise ultérieurement (Rolley-Le Coz & Billiet, 1980).

Remarque ajoutée lors de la correction des épreuves

Les méthodes mises au point pour analyser la conservation réticulaire peuvent certainement être appliquées à l'analyse de la distribution des noeuds dans les rangées et les plans des réseaux colorés dont l'étude a été entreprise par Harker (1978).

Références

BILLIET, Y. (1979). *Acta Cryst.* A**35**, 485–496.
BILLIET, Y. & ROLLEY-LE COZ, M. (1980). *Acta Cryst.* A**36**, 242–248.
HARKER, D. (1978). *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **75**, 5264–5267.
ROLLEY-LE COZ, M. & BILLIET, Y. (1980). En préparation.

Acta Cryst. (1980). A**36**, 792–795

Etude des Phases Ordonnées à Longue Période Irrationnelle. Les Alliages AuCu II et AuCu–Zn

PAR MICHEL GUYMONT

Laboratoire de Cristallographie et Physique des Matériaux, Bâtiment 490, *Université de Paris-Sud,* 91405 *Orsay CEDEX, France*

ET RICHARD PORTIER ET DENIS GRATIAS

CECM, 15 *rue Georges Urbain,* 94400 *Vitry sur Seine, France*

(*Reçu le* 15 *octobre* 1979, *accepté le* 8 *avril* 1980)

Abstract

It is shown, by electron diffraction and high-resolution microscopy, that AuCu II is a typical example of an irrational long-period alloy, contrary to Ag_3Mg, for instance, which is a typical rational long-period alloy. Antiphase boundaries are not planar (as is the case for Ag_3Mg) but rather fluctuating around a mean position, as shown by high-resolution images; this structure is well described by Jehanno & Pério's model [*J. Phys.* (1964), **25**, 966–974], which always involves some disorder localized in the boundaries themselves. The long period is always the result of an average of domains of different lengths, thus giving a *statistical* meaning to the irrationality. This structural behaviour is not confined to alloys with large values of the mean length of domains, as is demonstrated by the study of AuCu–Zn.

Introduction

Au contraire des alliages ordonnés à longue période variant de façon *rationnelle* et *discontinue* avec la composition, représentés par Ag_3Mg (Guymont & Gratias, 1979; Portier, Gratias, Guymont & Stobbs, 1980), les alliages ordonnés à antiphases périodiques (APP) *irrationnelles*, dont nous considérons AuCu II comme le prototype, sont des structures où la longue période varie de façon *continue* avec la composition: il est impossible d'exprimer la longueur moyenne M des domaines (mesurée en unités de la maille de Bravais de l'alliage désordonné $A1$) sous forme d'une fraction, comme c'est le cas pour toutes les compositions examinées de Ag_3Mg ordonné (Guymont & Gratias, 1978).

Nos observations confirment que les frontières d'antiphase, qui sont des plans dans Ag_3Mg, sont, dans AuCu II, fluctuantes à toute concentration autour d'une position moyenne déterminée qui donne une valeur *statistique* pour M, conformément au modèle de Jehanno & Pério (1964; Jehanno, 1965).

Ce comportement 'statistique' n'est pas limité aux APP a grandes valeurs de M: nous montrerons que le ternaire AuCu–Zn constitue un exemple de structure APP de type AuCu II où M peut prendre des valeurs allant de 5 à environ 1,5 suivant la concentration en Zn.

0567-7394/80/050792-04$01.00